English Summary:

5. Boltzmann equation

$$\boxed{\frac{\partial f(\underline{r},\underline{k},t)}{\partial t} + \underline{v}_g \cdot \underline{\nabla}_r f + \frac{-e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar} \underline{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}}}$$

kinetic: $f(\underline{r},\underline{k},t)$ prob. distrib. fct.

semiclassical transport eq. $\quad \underline{v}_g := \frac{1}{\hbar}\underline{\nabla}_k E(\underline{k})$, $\underline{\mathcal{E}}$ el. field

Moment expansion of Boltzmann eq. $\quad \phi(k) := k^m$, $m \in \mathbb{N}_0$

$\Rightarrow$ hydrodynamic balance eqs.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle\phi\rangle_n + \frac{\hbar}{m^*}\underline{\nabla}_r \langle \underline{k}\phi\rangle_n + \frac{e\underline{\mathcal{E}}}{\hbar}\langle \underline{\nabla}_k \phi\rangle = \int \phi(\underline{k}) \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{collision}} z\, d^3k} \quad (*)$$

Abbruch der Momentengl. hierarchie durch Näherungsannahmen:

(i) Störungstheoret. Entwicklung von $f(\underline{r},\underline{k},t)$

(ii) Annahme einer speziellen Form für f, z.B.

$$f(\underline{k}) = \frac{n}{N_c(T_e)} e^{-\frac{\hbar^2(\underline{k}-\underline{k}_0)^2}{2m^* k T_e}}$$

verschobene Maxwell-Boltzmann-Vert. (heated displaced Maxwellian)

$\underline{k}_0$ Verschiebung durch $\mathcal{E}$

T_e Elektronentemp.

N_c eff. Zustandsdichte im Leit. band (Entartungskonz.) $\gg n$

Nachteil: höhere zentrale Momente $(k - \langle k\rangle)^m \quad m > 2$ verschwinden

$\Rightarrow$ keine Bilanzgl. für Wärmestromdichte

oder $\quad f(\underline{k}) = f_0(|\underline{k}|) + f_1(|\underline{k}|)\, k_z \qquad z \parallel \mathcal{E}$

entspricht den ersten 2 Termen einer Legendre-Entwickl.

Speziell wählen wir:

$m=0$: $\quad \phi(k) = 1, \quad \langle\phi\rangle_n = n(\underline{r},t)$

$m=1$: $\quad \phi_i(\underline{k}) = \hbar k_i; \quad \hbar\langle\underline{k}\rangle_n = \underline{g}(\underline{r},t) = n(\underline{r},t)\,\underline{p}(\underline{r},t)$

mittl. Impuls pro Teilchen

$$\hbar\langle \underline{k}\rangle = \underline{p}(\underline{r},t) = m^* \underset{\substack{\uparrow\\ \text{mittlere Teilchengeschw.}}}{\underline{v}}$$

$$\underline{v} = \langle \underline{v}_g\rangle$$

$\underline{m=2}$: $\quad \phi(\underline{k}) = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, $\quad u(\underline{r},t) = n(\underline{r},t)\,\underset{\substack{\uparrow\\ \text{mittlere Energie pro Teilchen}}}{\overline{E}(\underline{r},t)}$

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2\langle k^2\rangle}{2m^*} = \underbrace{\frac{m^*}{2}\underline{v}^2}_{\substack{\text{konvektive}\\ \text{Energie}}} + \underbrace{\frac{3}{2}kT_e}_{\substack{\text{thermische}\\ \text{Energie}}}$$

Dabei wurde die Elektronentemp. T_e definiert durch

$$\frac{3}{2}kT_e := \frac{m^*}{2}\left[\langle \underline{v}_g^2\rangle - \langle \underline{v}_g\rangle^2\right]$$

$$= \frac{m^*}{2}\langle(\underline{v}_g - \langle\underline{v}_g\rangle)^2\rangle \qquad \text{Varianz der mikroskop. Geschwindigk.}$$

weitere Terme in Bilanzgleichungen (*)

(i) Impulsstromdichte

$$\underline{\nabla}_r \langle \hbar k_i \underline{v}_g\rangle_n = m^* \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j}\left[n\langle v_i v_j\rangle\right]$$

$$= \underset{\text{Mittelwert}}{m^* \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}\left[n\langle v_i\rangle\langle v_j\rangle\right]} + \underset{\text{Varianz}}{m^* \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}\left[n\langle (v_i - \langle v_i\rangle)(v_j - \langle v_j\rangle)\rangle\right]}$$

$$= \underbrace{(\underline{\nabla}_r(n\underline{v}))p_i + (n\underline{v}\,\underline{\nabla}_r)p_i}_{\text{konvektive Terme}} + \underbrace{\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}(nkT_{ij})}_{\text{Divergenz des Temp.tensors}}$$

$$kT_{ij} = m^*\langle (v_i - \langle v_i\rangle)(v_j - \langle v_j\rangle)\rangle$$

$$T_e = \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}\,\underline{\underline{T}}$$

(ii) Energiestromdichte $\underline{w}$

$$\underline{\nabla}_r \left\langle \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\underline{v}_g\right\rangle_n = \underline{\nabla}_r \int E(\underline{k})\,\underline{v}_g(\underline{k})\, f(\underline{r},\underline{k},t)\, 2\, d^3k = \underline{\nabla}\cdot \underline{w}(\underline{r},t)$$

$$w_i(\underline{r},t) = \frac{m^*}{2}n\,\langle v_g^2 v_i\rangle$$

$$= \frac{m^*}{2} n \Big\{ \langle \underline{v}_g^2 \rangle \langle v_i \rangle + \langle \underline{v}_g^2 (v_i - \langle v_i \rangle) \rangle$$
$$- 2 \langle (\underline{v}_g \langle \underline{v}_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle) \rangle$$
$$+ 2 \langle (\underline{v}_g \langle \underline{v}_g \rangle)(v_i - \langle v_i \rangle) \rangle$$
$$+ \underbrace{\langle \langle \underline{v}_g \rangle^2 (v_i - \langle v_i \rangle) \rangle}_{0} \Big\}$$

$$= \underbrace{n \bar{E} v_i}_{\text{Konvektion}} + \underbrace{j_{Q,i}}_{\text{Wärmestromdichte}} + \underbrace{\sum_{j=1}^{3} n k T_{ij} v_j}_{\text{Elektronendruck-Fluss}}$$

$$\underline{j}_Q(\underline{r},t) = \frac{m^*}{2} \int (\underline{v}_g - \langle \underline{v}_g \rangle)^2 (\underline{v}_g - \langle \underline{v}_g \rangle) f(\underline{r},\underline{k},t)\, z\, d^3k$$

(iii) Feldterm: $\left\langle \frac{\partial}{\partial k_j} k_i \right\rangle_n = n \delta_{ij}$

$$\frac{1}{\hbar} \langle \underline{\nabla}_k E(\underline{k}) \rangle_n = \langle v_g \rangle_n = n \underline{v}$$

Damit folgt aus (*)

$$\boxed{\begin{aligned}
&(1) \quad \frac{\partial}{\partial t} n + \underline{\nabla}_r (n \underline{v}) = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} z\, d^3k \\
&(2) \quad \frac{\partial}{\partial t}(n \underline{p}) + [\underline{\nabla}_r \cdot (n \underline{v})] \underline{p} + (n \underline{v} \cdot \underline{\nabla}_r) \underline{p} = -\mathrm{Div}(n k \underline{\underline{T}}) - e n \underline{\mathcal{E}} + \int \hbar \underline{k} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} z\, d^3k \\
&(3) \quad \frac{\partial}{\partial t}(n \bar{E}) + \underline{\nabla}_r (n \underline{v} \bar{E}) = -\underline{\nabla}_r (n k \underline{\underline{T}}\, \underline{v}) - \underline{\nabla}_r \underline{j}_Q - e n \underline{v} \cdot \underline{\mathcal{E}} + \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stoß}} z\, d^3k
\end{aligned}}$$

Gln. (1) – (3) haben die Form von Kontinuitätsgln. für

- Teilchendichte
- Impulsdichte
- Energiedichte

wobei die rechten Seiten Quellterme darstellen:

Impulsgewinn im el. Feld $(-e)n\underline{\mathcal{E}}$ (Kraftdichte)

Energiegewinn " $(-e)n\underline{v}\cdot\underline{\mathcal{E}} = \underline{j}\cdot\underline{\mathcal{E}}$ (Joule'sche Wärme)

- Teilchenzahländerung durch Generation u. Rekomb.
  (auch Augerrekomb. u. Stoßionisation)

$$J_0 := \int \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k = \varphi(n, \bar{E})$$ Generations-Rekomb.rate (g-r-Rate)

- Impulsrelaxation durch Streuung

$$\underline{J}_1 := \int \hbar \underline{k} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k$$ Impulsrelax. rate

- Energierelaxation

$$J_2 := \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Stoß} z\, d^3k$$ Energierelax. rate

Wegen der Stoßterme J_0, J_1, J_2 und weil ein drittes Moment ($\underline{j}_Q$) und nichtdiagonale 2. Momente (T_{ij}) angekoppelt sind $\longrightarrow$ kein geschlossenes Gl.system

Annahme:

$$J_0 = \varphi(n, \bar{E})$$ g-r-Rate

$$\underline{J}_1 = -n \frac{\underline{p}}{\tau_m}$$ Impulsrelax. zeit τ_m

$$J_2 = -n \frac{\bar{E} - \bar{E}_0}{\tau_e}$$ Energierelax. zeit τ_e

$$T_{ij} = T_e \delta_{ij}$$ El. temp. T_e

$$\underline{j}_Q = -\kappa \underline{\nabla} T_e$$ Fourier-Gesetz

$$(1')\quad \dot{n} + \underline{\nabla}(n\underline{v}) = \varphi(n,\bar{E})$$

$$(2')\quad \dot{\underline{p}} + (\underline{v}\cdot\underline{\nabla})\underline{p} + \frac{1}{n}\underline{\nabla}(nkT_e) + e\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\underline{p}}{\tau_m'}$$

$$\frac{1}{\tau_m'} := \frac{1}{\tau_m} + \varphi$$

$$(3')\quad \dot{\bar{E}} + (\underline{v}\cdot\underline{\nabla})\bar{E} + \frac{1}{n}\underline{\nabla}(nkT_e\underline{v}) - \frac{\kappa}{n}\Delta T_e + e\underline{v}\cdot\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\bar{E}-\bar{E}_0}{\tau_e'}$$

$$\frac{1}{\tau_e'} = \frac{1}{\tau_e} + \varphi$$

(Nebenrechn.: Benutze in (2'), (3'): $\dot{n} + \underline{\nabla}(n\underline{v}) = \varphi$)

5.4. Drift-Diffusions-gleichung

Annahme: Impuls- u. Energierelaxation schneller als alle anderen Prozesse

$\Rightarrow$ adiabat. Elim. von $\underline{p}$ und $\bar{E}$

Impuls: $\frac{d}{dt}\underline{p} = \frac{\partial}{\partial t}\underline{p} + \underline{v}\cdot\underline{\nabla}\underline{p} \approx 0$, $T_{ij} = T_e\delta_{ij}$

$$(2')\quad 0 = \frac{1}{n}\underline{\nabla}(nkT_e) + e\underline{\mathcal{E}} = -\frac{\underline{p}}{\tau_m'}$$

$$\Rightarrow \underset{\text{El. stromdichte}}{\underline{j}} = -en\underline{v} = -e\frac{n}{m^*}\underline{p} = \underbrace{\frac{e}{m^*}\tau_m'}_{\mu \text{ Mobilität}}\, ne\left(\underline{\mathcal{E}} + \frac{1}{en}\underline{\nabla}(nkT_e)\right)$$

$$\underline{\nabla}T_e \approx 0$$

$$\underline{j} = \underbrace{en\mu}_{\sigma = \text{el. Leitfähigkeit}}\left(\underline{\mathcal{E}} + \frac{kT_e}{en}\underline{\nabla}n\right)$$

$$D := \frac{\mu kT_e}{e} \quad \text{Diffusionskonstante}$$

(Einstein-Beziehung)

$$\Rightarrow \underline{j} = -en\underline{v} = \underbrace{\sigma\underline{\mathcal{E}}}_{\text{Drift}} + \underbrace{eD\underline{\nabla}n}_{\text{Diffusion}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\dot{n} = \varphi(n, \bar{E}) + D\,\Delta n + \underline{\nabla}(n\mu\underline{\mathcal{E}})}$$

Reaktions – Diffusions – Drift – Gl.

Energiebilanz: räuml. + zeitl. Ableitungen vernachlässigt

$$\Rightarrow \quad \bar{E} = \bar{E}_0 + \underbrace{e\tau_e'\mu\,\mathcal{E}^2}_{\text{Joule'sche Wärme}}$$